

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Série No. 6

25 Mars 2025

But de cette série : comprendre le concept de densité de modes

1. Densité de modes normaux $g(\omega)$ à 1D

Considérer la relation de dispersion d'une chaîne unidimensionnelle, formée par N atomes de masse m distants de a (réseau monoatomique), avec C la constante de rappel entre premiers voisins :

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

Dans l'approximation de Debye la relation de dispersion devient :

$$\omega = c|k|$$

avec c un paramètre qui permet de décrire au mieux l'ensemble de la relation de dispersion et que ne correspond pas nécessairement à la pente à l'origine.

- Faire un raisonnement basé sur les représentations graphiques de $\omega(k)$ pour trouver l'allure qualitative de la densité de modes $g(\omega)$ dans les deux descriptions.
- Trouver l'expression pour $g(\omega)$ dans le cas du modèle de Debye et dans le cas de la relation de dispersion exacte. (Les deux expressions sont données au début de l'exercice 2).

Indications : plusieurs façons de procéder sont possibles :

- utiliser une des relations données au cours ;
- faire un raisonnement basé sur la relation entre densité de modes dans l'espace des k et densité de modes dans l'espace des ω .

2. Chaleur spécifique d'un réseau monoatomique unidimensionnel

Nous avons trouvé à l'exercice 1 que la densité de modes $g(\omega)$ pour un réseau monoatomique unidimensionnel (N atomes de masse m distants de a , constante de rappel C , interaction limitée aux premiers voisins) est donnée par

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a \sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} = \frac{2n}{\pi \sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$$

où $\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{C}{m}}$ est la fréquence maximale dans la relation de dispersion et $n = N/(Na) = 1/a$ est la densité atomique.

Dans l'approximation de Debye, $\omega = c|k|$; pour la densité de modes on a trouvé

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi c} = \frac{1}{a\omega_D} = \frac{n}{\omega_D}$$

où $\omega_D = ck_D$ et $n = 1/a$ est la densité atomique.

- Considérer le cas du modèle de Debye. Ecrire l'expression de la densité d'énergie interne u en fonction de la densité de modes. Ensuite, trouver la chaleur spécifique c_v pour les limites à haute température ($k_B T \gg \hbar\omega_D$) et à basse température ($k_B T \ll \hbar\omega_D$).

Indication : lors du calcul de c_v , procéder à la dérivation par rapport à T après avoir choisi la limite de température haute ou basse.

$$\int \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 - x^2}} dx = \arcsin\left(\frac{x}{\alpha}\right) ; \quad \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \approx 1 + \frac{1}{2}x^2 \quad (x \ll 1)$$

$$\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6} ; \quad \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

- (b) Considérer maintenant la description exacte. Ecrire l'expression de u et trouver la chaleur spécifique c_v pour les limites à haute température ($k_B T \gg \hbar\omega_{max}$) et à basse température ($k_B T \ll \hbar\omega_D$).

Indication : dans ce cas aussi, procéder à la dérivation par rapport à T après avoir choisi la limite de température haute ou basse.

- (c) Comparer les résultats trouvés aux points (a) et (b).

3. Densité de modes $g(\omega)$ d'un système bidimensionnel

Dans la série 4 nous avons considéré les modes de vibrations d'un système monoatomique bidimensionnel, où nous avons considéré seulement une branche (modes hors plan).

Nous avons vu que dans la direction $[1, 0]$, $k_y = 0$, $k = k_x$, et

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

et dans la direction $[1, 1]$, avec $k_x = k_y = k/\sqrt{2}$:

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{2C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2\sqrt{2}} \right|$$

avec m la masse des atomes, a le paramètre de maille égal à la distance entre atomes, et C la constante de rappel entre premiers voisins.

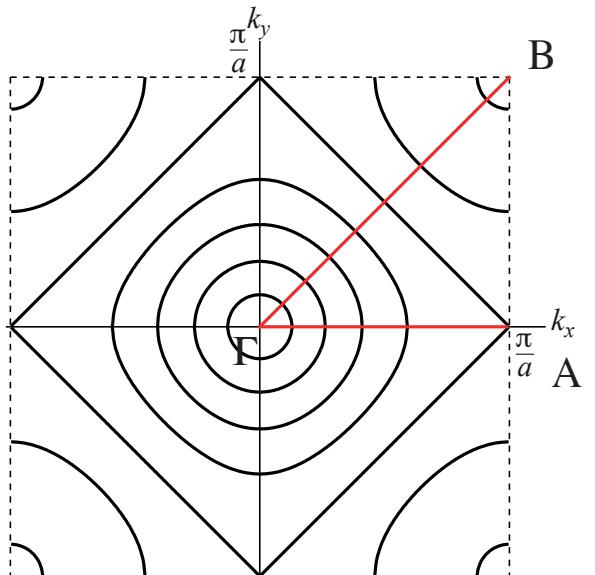
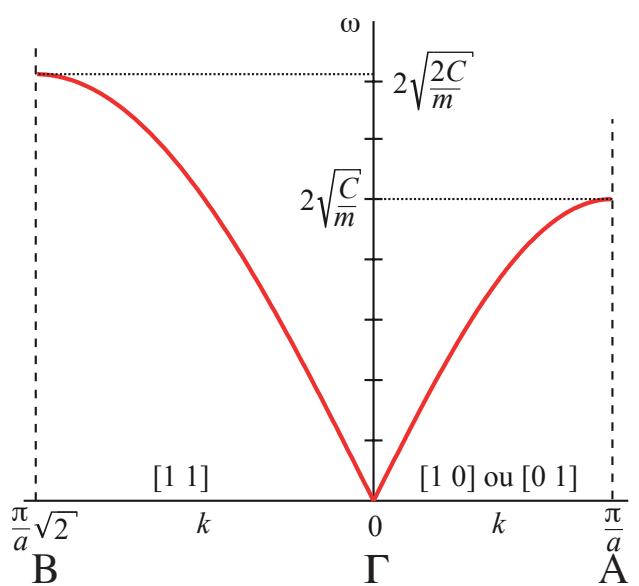
La figure à la page suivante montre les courbes de dispersion dans deux directions à haute symétrie dans la première zone de Brillouin (à gauche) (équivalentes au résultat de l'exercice de la série 4), et des courbes d'isofréquence (à droite).

- (a) Comprendre la signification des courbes d'isofréquence, et interpréter leur forme dans la 1ère zone de Brillouin. Quels types de points sont les points Γ , A et B (minima, maxima, ou autre) ? Que signifie la forme circulaire des courbes à proximité de Γ et B ?
- (b) La densité de modes pour un système tridimensionnel est donnée par :

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{surface \omega_s(\mathbf{k})=cte} \frac{dS_\omega}{|\nabla \omega_s(\mathbf{k})|}$$

Ecrire l'expression équivalente pour le cas d'un système bidimensionnel.

- (c) Sans faire de calculs : en considérant la relation de dispersion, les courbes isofréquence, et l'expression de $g(\omega)$, pour quelles valeurs de ω peut-on s'attendre à des points singuliers dans $g(\omega)$? Que se passe-t-il pour $\omega(\pi/a, 0)$? Et pour $\omega(\pi/a, \pi/a)$?

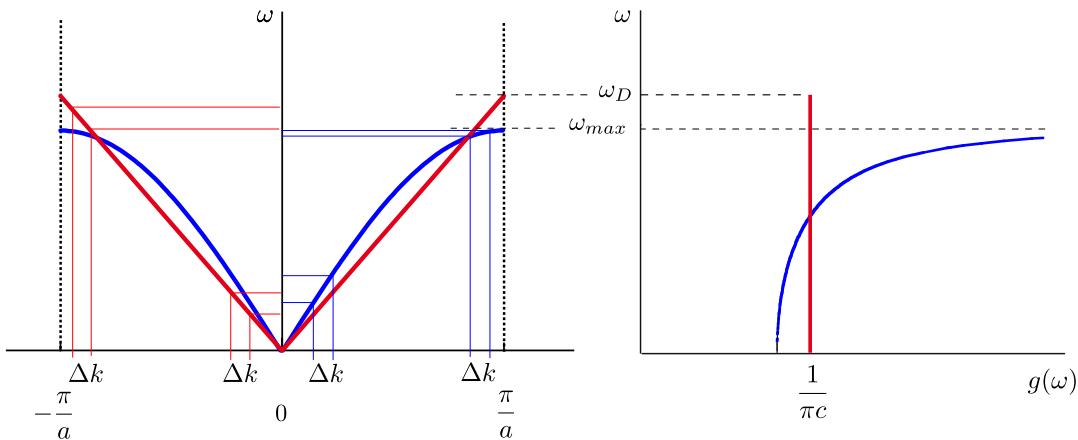


1. Densité de modes normaux $g(\omega)$ à 1D

- (a) Nous avons vu que la densité de modes dans l'espace k est constante : à une dimension elle vaut $L/2\pi$. Cela signifie que dans chaque interval de largeur donnée Δk il y a le même nombre de vecteurs k permis.

La partie à gauche de la figure ($\omega(k)$ vs. k dans la 1ère ZB) montre que la densité de modes en ω est constante si l'on considère l'approximation de Debye (en rouge) : à Δk correspond un $\Delta\omega$ qui a toujours la même largeur, donc la densité de modes est constante en ω .

Par contre, si l'on considère la relation de dispersion exacte (en bleu), on voit que, lorsque la courbe devient plate, les modes dans l'intervalle Δk sont concentrés dans un $\Delta\omega$ qui est plus petit : la densité de modes en ω est donc plus grande. (Note : Ceci est toujours valable dans les cas 1D, mais la situation peut être différente dans les cas 2D et 3D.)



- (b) Comme mentionné dans l'énoncé, on peut procéder de différentes façons pour trouver $g(\omega)$.

- i) En utilisant l'équation 3.28 du cours

$$g(\omega) = \sum_s \int_{\text{1ère ZB}} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta[\omega - \omega_s(\mathbf{k})]$$

A une dimension : une seule branche ($s = 1$) ; $\frac{d^3k}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{dk}{2\pi} = \frac{2dk}{2\pi}$:

$$g(\omega) = \int \frac{dk}{\pi} \delta[\omega - \omega(\mathbf{k})]$$

On peut utiliser cette relation pour calculer $g(\omega)$ dans l'approximation de Debye :

$$g_{\text{Debye}}(\omega) = \int_0^{k_D} \frac{dk}{\pi} \delta[\omega - ck] = \int_0^{\omega_D} \frac{d\omega}{\pi c} \delta[\omega - ck] = \frac{1}{\pi c} \quad \text{pour } \omega < \omega_D$$

On trouve bien que $g(\omega)$ est constante pour $\omega < \omega_D$, et zéro pour $\omega > \omega_D$

ii) En utilisant l'équation 3.29 du cours

$$g(\omega) \frac{1}{(2\pi)^3} \Sigma_s \int_{\text{1ère ZB}} \frac{dS}{|\mathbf{grad} \omega(\mathbf{k})|}$$

Cas unidimensionnel avec $s = 1$ (une branche) : la “surface” correspond à deux points :

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{2}{\left| \frac{d\omega(k)}{dk} \right|}$$

On peut refaire le calcul de $g(\omega)$ dans l'approximation de Debye :

$$g_{Debye}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{2}{c} = \frac{1}{\pi c}$$

Pour le calcul de $g(\omega)$ à partir de la relation de dispersion exacte (on définit $\omega_{max} = 2\sqrt{C/m}$) :

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{2}{\left| \frac{d\omega(k)}{dk} \right|} = \frac{1}{\pi \omega_{max} \frac{a}{2} \cos \frac{ka}{2}} = \frac{2}{\pi a \omega_{max} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{ka}{2}}} = \frac{2}{\pi a \sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$$

iii) On peut aussi trouver ces résultats de façon plus intuitive puisque le système est **isotrope** (nécessairement puisque il est unidimensionnel). Le volume du système dans l'espace direct est $L = Na$, donc le volume de l'espace réciproque occupé par chaque vecteur k est $\frac{2\pi}{Na}$. Le nombre de valeurs k permises dans le volume infinitésimal de l'espace réciproque $d\mathbf{k}$ (1D) par unité de volume du cristal est

$$\tilde{g}(k)d\mathbf{k} = \frac{Na}{2\pi} \frac{1}{Na} d\mathbf{k}$$

La relation entre $g(\omega)$ et $\tilde{g}(k)$ est (à une dimension) :

$$g(\omega)d\omega = \tilde{g}(k)d\mathbf{k} = \tilde{g}(k)2dk$$

$$g(\omega)d\omega = \frac{Na}{2\pi} \frac{1}{Na} 2dk$$

Pour obtenir l'expression de $g(\omega)$, il faut récrire cette relation en fonction de ω en utilisant la relation de dispersion.

Dans l'approximation de Debye :

$$g_{Debye}(\omega)d\omega = 2 \frac{1}{2\pi} dk \quad \rightarrow \quad g_{Debye}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} = \frac{1}{\pi c}$$

Pour la relation de dispersion exacte :

$$g(\omega)d\omega = 2 \frac{1}{2\pi} dk \quad \rightarrow \quad g(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\frac{d\omega}{dk}} = \frac{2}{\pi a \sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$$

2. Chaleur spécifique d'un réseau monoatomique unidimensionnel

En général, pour un système 3D, l'expression pour la densité d'énergie est donnée par :

$$u = \sum_s \int_{\text{1ZB}} \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \hbar \omega_s(\mathbf{k}) \left(\langle n_{\mathbf{k},s} \rangle + \frac{1}{2} \right)$$

On peut récrire cette expression à l'aide de la densité de modes $g(\omega)$, comme indiqué par l'équation (3.27) du polycopié :

$$u = \int_0^{\omega_{\max}} \hbar \omega g(\omega) \left(\langle n(\omega) \rangle + \frac{1}{2} \right) d\omega$$

Dans cette l'expression, la dimension du système (1D, 2D, 3D) est prise en compte par $g(\omega)$. L'avantage est de pouvoir traiter une intégrale sur une grandeur scalaire indépendamment de la dimension du système.

On va utiliser cette expression pour le système unidimensionnel, avec relation de dispersion décrite dans le modèle de Debye et relation de dispersion exacte.

(a) Dans le modèle de Debye

$$u = \int_0^{\omega_D} \hbar \omega g(\omega) \left(\langle n(\omega) \rangle + \frac{1}{2} \right) d\omega = \frac{1}{a\omega_D} \int_0^{\omega_D} \hbar \omega \left(\frac{1}{\exp\left\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right\} - 1} + \frac{1}{2} \right) d\omega$$

Dans l'expression de la chaleur spécifique on peut négliger directement le demi quantum, puisque il ne dépend pas de la température :

$$c_v = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a\omega_D} \int_0^{\omega_D} \hbar \omega \frac{1}{\exp\left\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right\} - 1} d\omega$$

A haute température : $k_B T \gg \hbar\omega_D$

On peut approximer $e^x \approx 1 + x$ avec $x = \hbar\omega/k_B T$ et on obtient (avec $n = \frac{1}{a}$) :

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a\omega_D} \int_0^{\omega_D} \hbar \omega \frac{k_B T}{\hbar \omega} d\omega = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a\omega_D} k_B T \omega_D = \frac{\partial}{\partial T} \frac{k_B T}{a} = n k_B$$

A basse température : $k_B T \ll \hbar\omega_D$

On peut étendre l'intégrale jusqu'à ∞ (l'argument de l'intégrale $\rightarrow 0$ pour $\omega \rightarrow \infty$). Avec la substitution $x = \hbar\omega/k_B T$, on obtient :

$$\begin{aligned} c_v &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a\omega_D} \int_0^{\infty} \hbar \omega \frac{1}{\exp\left\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right\} - 1} d\omega = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a\omega_D} \frac{(k_B T)^2}{\hbar} \int_0^{\infty} \frac{x}{e^x - 1} dx = \\ &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a\omega_D} \frac{(k_B T)^2}{\hbar} \frac{\pi^2}{6} = \frac{\pi^2}{3} n k_B \frac{k_B}{\hbar \omega_D} T = \frac{\pi^2}{3} n k_B \frac{T}{\theta_D} \end{aligned}$$

A une dimension, la chaleur spécifique à basse température est proportionnelle à T .

(b) En partant de la relation de dispersion exacte

$$u = \int_0^{\omega_{max}} \hbar\omega g(\omega) \left(\langle n(\omega) \rangle + \frac{1}{2} \right) d\omega = \int_0^{\omega_{max}} \hbar\omega \frac{2}{\pi a \sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} \left(\frac{1}{\exp\left\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right\} - 1} + \frac{1}{2} \right) d\omega$$

La chaleur spécifique, comme au point (a) :

$$c_v = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{2}{\pi a} \int_0^{\omega_{max}} \hbar\omega \frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} \frac{1}{\exp\left\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right\} - 1} d\omega$$

A haute température : $k_B T \gg \hbar\omega_{max}$

On peut approximer $e^x \approx 1 + x$ avec $x = \hbar\omega/k_B T$ et on obtient :

$$c_v = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{2}{\pi a} \int_0^{\omega_{max}} \hbar\omega \frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} \frac{k_B T}{\hbar\omega} d\omega$$

en utilisant $\int \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 - x^2}} dx = \arcsin\left(\frac{x}{\alpha}\right)$, on trouve

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{2}{\pi a} k_B T \arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_{max}}\right) \Big|_0^{\omega_{max}} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a} k_B T = \frac{1}{a} k_B = n k_B$$

Alternative : en substituant $\frac{\omega}{\omega_{max}} = \sin x$; $d\omega = \omega_{max} \cos x dx$; $0 \rightarrow 0$; $\omega_{max} \rightarrow \frac{\pi}{2}$:

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{2}{\pi a} k_B T \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos x}{\sqrt{1 - \sin^2 x}} dx = \frac{\partial}{\partial T} \frac{2}{\pi a} k_B T \frac{\pi}{2} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{a} k_B T = \frac{1}{a} k_B = n k_B$$

A basse température : $k_B T \ll \hbar\omega_{max}$

On peut étendre l'intégrale jusqu'à ∞ .

Comme $\frac{\omega}{\omega_M} \ll 1$, on peut développer $\frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$ au premier ordre :

$$\frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} \approx \frac{1}{\omega_{max}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{\omega_{max}^2} \right)$$

$$c_v = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{2}{\pi a} \int_0^{\infty} \hbar\omega \frac{1}{\omega_{max}} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\omega^2}{\omega_{max}^2} \right) \frac{1}{\exp\left\{\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right\} - 1} d\omega$$

Avec la substitution $x = \hbar\omega/k_B T$, on obtient :

$$\begin{aligned} c_v &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{2}{\pi a} \left(\frac{1}{\hbar\omega_{max}} (k_B T)^2 \int_0^{\infty} \frac{x}{e^x - 1} dx + \frac{1}{2} \frac{1}{\hbar^3 \omega_{max}^3} (k_B T)^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{2}{\pi} \frac{\pi^2}{6} n k_B \frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} T^2 + \frac{1}{\pi} \frac{\pi^4}{15} n k_B \left(\frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} \right)^3 T^4 \right) \end{aligned}$$

$$c_v = \frac{4\pi^2}{\pi} \frac{n k_B}{6} \frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} T + \frac{4\pi^4}{\pi} \frac{n k_B}{15} \left(\frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} \right)^3 T^3$$

$$= \frac{2\pi}{3} n k_B \frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} T + \frac{4\pi^3}{15} n k_B \left(\frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} \right)^3 T^3$$

(c) A haute température, les deux modèles donnent le même résultat : $c_v = n k_B$.

A basse température, on a un terme linéaire dans les deux cas, et un terme correctif en T^3 si on considère la relation de dispersion exacte :

$$\text{Debye : } c_v = \frac{\pi^2}{3} n k_B \frac{k_B}{\hbar\omega_D} T$$

$$\text{Exact : } c_v = \frac{2\pi}{3} n k_B \frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} T + \frac{4\pi^3}{15} n k_B \left(\frac{k_B}{\hbar\omega_{max}} \right)^3 T^3$$

Si on prend c correspondant à la pente pour $k \rightarrow 0$, on trouve la même valeur pour la constante du terme linéaire.

3. Densité de modes $g(\omega)$ d'un système bidimensionnel

(a) Les courbes d'isofréquence correspondent aux valeurs (k_x, k_y) pour lesquels ω est constante, égale à une valeur donnée. On voit bien que pour des petits k les courbes isofréquence sont des cercles. C'est la gamme dans laquelle la relation de dispersion est linéaire et ne dépend pas de la direction, le système est isotrope (dépendance du module de k uniquement). Lorsque on s'éloigne du point $\Gamma = (0, 0)$, les courbes d'isofréquence changent un peu de forme jusqu'à devenir un carré : en effet pour des questions de symétrie la courbe d'isofréquence qui correspond à $k = \pi/a$ est le carré montré dans la figure. Ensuite, lorsque on augmente encore k_x et k_y en restant dans la 1ère ZB, on s'approche des points de type B = $(\pi/a, \pi/a)$. Les courbes isofréquence deviennent des cercles centrés sur chaque point de type B. Le point Γ est un minimum, les points de type B sont des maxima, les points de type A sont des points de selle (le gradient de ω change de signe selon la direction).

(b) Pour le cas 2D et pour une seule branche ($s = 1$), les surfaces correspondent à des lignes et on peut écrire :

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\text{courbe } \omega(\mathbf{k})=\text{cte}} \frac{dl_\omega}{|\nabla\omega(\mathbf{k})|}$$

(c) On s'attend à des points singuliers pour les valeurs de ω où le gradient s'annule : $\omega = \omega(\pi/a, 0)$ et $\omega = \omega(\pi/a, \pi/a)$. Par contre, un point singulier ne correspond pas nécessairement à un pic dans la densité de modes $g(\omega)$. En effet, dans le calcul de $g(\omega)$ il faut aussi tenir compte de la surface (à 2D c'est une ligne, une courbe) de fréquence constante sur laquelle il faut faire l'intégrale.

On peut avoir une divergence lorsque $\nabla\omega_s \rightarrow 0$, mais si la surface correspondante sur laquelle on intègre tend vers zéro, on aura pas de divergence : les deux comportements se compensent et on aura un point singulier qui n'est pas une divergence.

Pour faire l'intégrale, il faut considérer des lignes fermées (schéma de zone répétées).

Dans le cas de notre système bidimensionnel, $g(\omega)$ présentera un pic pour ω qui correspond à des k du type $(\pi/a, 0)$ (la longueur de la courbe de fréquence constante ne tend pas à zéro, au contraire, c'est la plus longue de toutes les courbes). Par contre, pour ω à proximité des points de type B, la longueur des lignes d'isofréquence tend vers zéro. $g(\omega)$ présentera un point singulier, mais ce n'est pas un pic. En effet, $g(\omega)$ tend rapidement à une valeur constante.